2Д

УДК 519.6

О.А. Дмитриева
Донецкий национальный технический университет, г. Донецк, Украина
dmitriv@pmi.dgtu.donetsk.ua

Параллельное моделирование жестких систем на основе диагонализации полной матрицы

В работе предлагается подход, который базируется на неявных многостадийных методах, модифицированных таким образом, что неявные стадии становятся параллельными. Сокращение числа обменов достигается за счет преобразования исходной матрицы, приводящего функциональный определитель к диагональному виду. Получаемые на основе такого подхода расчетные схемы обладают меньшей вычислительной сложностью и являются весьма эффективными при решении жестких уравнений.

Введение

Данная работа является продолжением исследований, представленных в [1-6], и посвящена параллельной численной реализации решения задачи Коши с помощью неявных методов, ориентированных на решение жестких уравнений и их систем. Интегрирование таких уравнений основано на формировании и решении на каждом шаге нелинейной системы алгебраических уравнений размерностью $m \times s$, где m – размерность системы или наивысший порядок уравнения, s – число стадий метода. Эффективное решение такой системы является главной проблемой при реализации неявного стадийного метода [7-10]. Классический подход заключается в использовании итерационного метода Ньютона с полным якобианом [7]. При решении жестких систем этот подход является непривлекательным из-за высокой трудоемкости реализации, связанной, прежде всего, с необходимостью многократного переопределения величины шага интегрирования на участках быстрого изменения производной [1], [3], [4].

Для решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений на сегодняшний день предлагаются различные типы параллельных методов [8-10]. Большая часть их базируется на неявных методах, обычно классических многостадийных методах Рунге-Кутты, в которых неявные отношения разрешаются с помощью итерационного процесса. В пределах каждой итерации стадийный метод обладает хорошим параллелизмом, так как вычисление компонентов вектора на итерации распределяется по s процессорам. Однако после каждой итерации процессоры должны обмениваться полученными результатами, а это подразумевает частую связь между процессорами. Такой мелкозернистый параллелизм особенно не привлекателен при использовании в компьютерах с распределенной памятью.

В работе предлагается альтернативный подход, который также базируется на неявных многостадийных методах, модифицированных таким образом, что неявные стадии являются уже параллельными, так, что значения в стадийных точках могут быть получены независимо друг от друга. То есть обмен значениями процессоры осуществляют не после каждой итерации, а после получения значения для очередной

расчетной точки. Такое радикальное сокращение числа обменов достигается за счет использования диагонального приближения исходной матрицы, приводящее исходный функциональный определитель к диагональному виду. Получаемые на основе такого подхода расчетные схемы обладают меньшей вычислительной сложностью и являются весьма эффективными при решении жестких уравнений.

Цель данной работы состоит в создании расчетных схем для параллельного решения жестких уравнений и их систем, приводящих исходный функциональный определитель к диагональному виду, что обеспечивает сокращение числа обменов на итерациях по стадийным точкам.

Диагонализация исходной матрицы неявного метода

При реализации численного решения задачи Коши

$$\frac{dx}{dt} = f(t,(x(t)), \quad x(t_0) = x_0 \tag{1}$$

с помощью неявных методов

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b^t \end{array} \tag{2}$$

полная матрица А предварительно приводится к диагональному виду. При этом среди множества возможных вариантов приближения D выбираются такие, что спектральный радиус

$$\rho(I - D^{-1}A) = 0 \tag{3}$$

или

$$\rho(I - D^{-1}A) \to min\,. \tag{4}$$

Решение задачи, связанной с поиском корней нелинейного уравнения (3), эквивалентно задаче

$$\det(D^{-1}A - \lambda I) = 0\,, \tag{5}$$

количество корней которой определяется стадийностью метода и равно s:

$$det(D^{-1}A - \lambda I) = (1-\lambda)^s\,.$$

Это уравнение преобразовывается к следующему виду

$$(-\lambda)^s + \sum_{i=1}^{s} \mu_i (-\lambda)^{s-i} = (-\lambda)^s + \sum_{i=1}^{s} C_s^i (-\lambda)^{s-i}\,, \tag{6}$$

где C_s^i – комбинаторное соединение числа сочетаний,

μ_i – коэффициенты характеристического многочлена $D^{-1}A$.

μ_i оцениваются как сумма миноров i-й степени, симметричных относительно главной диагонали $D^{-1}A$. В частности, предельные случаи

$$\mu_1 = trace(D^{-1}A), \quad \mu_s = det(D^{-1}A)\,.$$

В (6) левая и правая части эквивалентны, если соответствующие коэффициенты μ_i и C_s^i совпадают. На этом основании формируется нелинейная система из s неизвестных, такая что

$$\mu_i = C_s^i, \quad i = 1,2,...,s\,. \tag{7}$$

Из множества возможных решений этой системы, максимальное число которых определяется как $2^s - 1$, выбирается такое

$$D^{-1} = diag(d_1, d_2, ..., d_s),$$

на котором выполняются соотношения (3) или (4). Этот вариант D^{-1} обеспечит лучшую сходимость численной реализации. Для такого выбора на каждом полученном решении строится матрица вида

$$Z(z) = z(I - zD)^{-1}(A - D) \tag{8}$$

и исследуется спектр ее собственных значений. По каждому полученному решению оценивается максимальное собственное значение $max(\rho(Z(z))$ спектра матрицы $Z(z)$. Среди множества решений для реализации выбирается вариант с минимальным значением $max(\rho(Z(z))$. Таким образом, подход для выбора матрицы *D*, рассматриваемый в этой работе, базируется на минимизации спектрального радиуса матрицы.

Модификация неявных методов для жестких задач на основе диагональной матрицы

При построении адекватных математических моделей учитывается большое число факторов, что неизбежно приводит к явлению жесткости и описывающим его жестким системам. Под жесткими уравнениями будем подразумевать такие, для которых определенные неявные методы дают лучший результат, обычно несопоставимый с явными методами [7]. Формализация такого прагматического определения для разных типов уравнений и систем может носить различный характер [8].

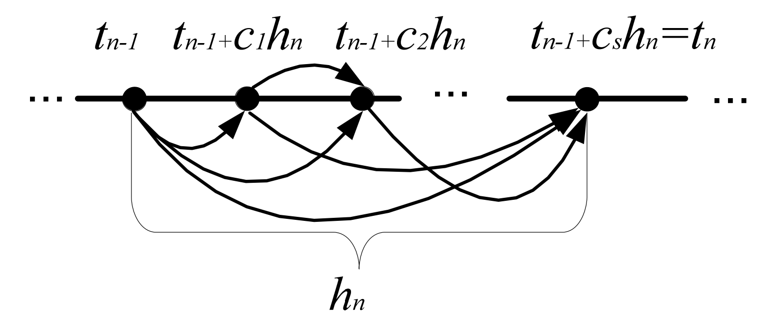


Рисунок 1 – Шаблон *s* – стадийного неявного метода

В качестве исходного метода решения жесткой системы выбирается *s* – стадийный неявный метод

$$G^{(j)} = X_n^{(j)} + h_n(A \times F(X_n^{(j)})), \quad j = 1,2,...,q,$$
$$x_n = x_{n-1} + h_n(b^T \times I_d)F(G^{(q)}) \tag{9}$$

с шаблоном, приведенным на рис. 1. Параллельный вариант реализации такого метода

$$X_n^{(j)} = (A \times I_d)X_n^{(j-1)} + h_n(D \times I_d)F(X_n^{(j)}), \quad j = 1,2,...,q,$$
$$x_n = x_{n-1} + h_n(b^T \times I_d)F(X_n^{(q)}) \tag{10}$$

с шаблоном, приведенным на рис. 2, модифицируется.

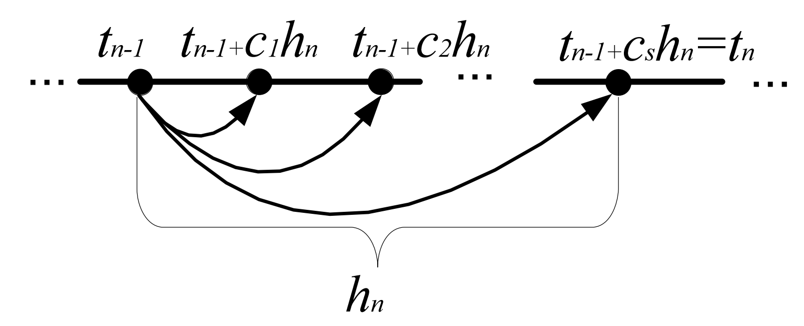


Рисунок 2 – Шаблон *s* – стадийного параллельного метода

Для этого вводятся дополнительные стадийные точки, которые были получены на последней итерации при расчете значения для точки t_{n-1} следующим образом

$$X_n^{(0)} = P(X_{n-1}^{(q)}, x_{n-1}), \quad n = 1,2,...,N,$$

Шаблон расчетной схемы приведен на рис. 3. Тогда модифицированный параллельный полностью неявный метод будет иметь вид

$$X_n^{(j)} - h_n(D \times I_d)F(X_n^{(j)}) = e \times x_{n-1} + h_n((A-D) \times I_d)F(X_n^{(j-1)}), \quad j = 1,2,...,q,$$
$$x_n = x_{n-1} + h_n(b^T \times I_d)F(X_n^{(q)}), \qquad (11)$$

где *s* обозначает количество стадий неявного стадийного метода, описанного с помощью с, *A,* и *b* (2).

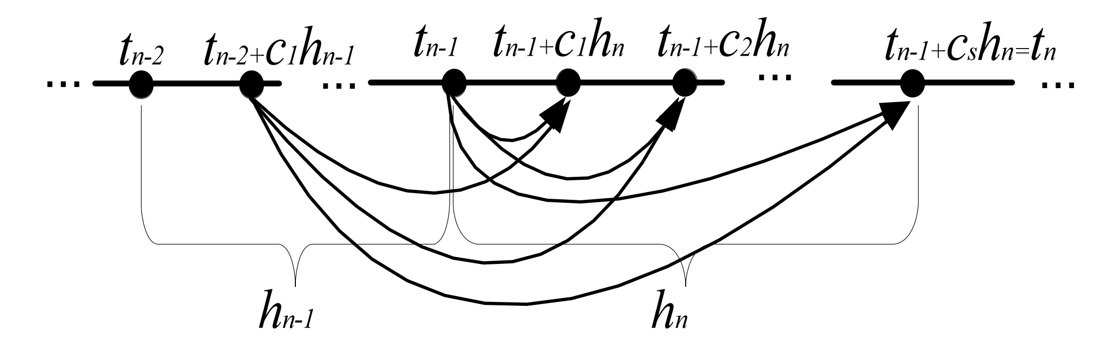


Рисунок 3 – Шаблон модифицированного *s* – стадийного параллельного метода

Вектор X_n состоит из *s* вложенных стадийных векторов $x_{n,1}, x_{n,2}, ..., x_{n,s}$, каждый являющийся приближением к решению в промежуточных стадиях по времени $t_{n-1} + c_i h_n$, и $F(X_n)$ состоит из вложенных векторов $f(x_{n,1}), f(x_{n,2}),..., f(x_{n,s})$. I_d обозначает единичную матрицу размерности *s* и $e = (1..., 1)^T$ – единичный вектор размерности *s*. *P* – вектор стадийных значений последней итерации при расчете значения для t_{n-1}, *N* – количество шагов по времени, и *q* – количество итераций, обеспечивающее вычисление корректора с заданной точностью. Исходя из того, что *D* является диагональной матрицей, *s* стадийных векторов в $X_n^{(j)}$ могут быть вычислены параллельно.

Исследование устойчивости неявных методов на основе диагональной матрицы

При исследовании устойчивости блочных разностных методов для жестких систем уравнений, так же, как и для классических методов, обычно рассматривают модельное уравнение

$$\frac{dx}{dt} = \lambda x, \tag{12}$$

где – произвольное комплексное число. Свойства различных методов анализируют на примере модельного уравнения (12). Для того чтобы уравнение (11) действительно моделировало исходную систему (1), необходимо рассматривать его при всех таких λ, которые являются собственными числами матрицы (8). Кроме того, все корни характеристического уравнения (8) не должны превосходить по модулю единицу. При $|z| \to 0$ накапливаются нежесткие компоненты ошибки

$$Z(z) \to z(A - D),$$

при $|z| \to \infty$ – жесткие компоненты ошибки

$$Z(z) \to I - D^{-1}A.$$

Собственные числа матрицы $I - D^{-1}A$ при этом должны соответствовать условиям (3-4). Плохая обусловленность собственных чисел – одна из причин, усложняющая минимизацию спектрального радиуса матрицы и увеличивающая время получения решения. В работе предлагается не только минимизация $\rho(I - D^{-1}A)$ для неявных методов с числом стадий $s \geq 2$, но и поиск точного решения $\rho(I - D^{-1}A) = 0$. Использование *Mathematica* для символьных вычислений значительно упрощает эту процедуру. При этом можно получать как точные решения нелинейных уравнений, что возможно при $s \leq 4$ [8], так и численные решения с заданной степенью точности.

Численная реализация построения диагональной матрицы

Рассмотрим несколько вариантов построения диагональных матриц *D* для многостадийных методов. В качестве исходных для диагонализации выбираются известные полностью неявные стадийные методы. Для каждого из выбранных исходных методов определяется лучший вариант диагонализации.

Выберем в качестве варианта диагонализации неявный трехстадийный метод Лобатто IIIС порядка 4 [7]. Из исходной матрицы А

$$\begin{pmatrix} 1/6 & -1/3 & 1/6 \\ 1/6 & 5/12 & -1/12 \\ 1/6 & 2/3 & 1/6 \end{pmatrix} \tag{13}$$

формируется матрица $D^{-1}A$ с искомыми элементами $D^{-1} = diag(d_1, d_2, d_3)$

$$\begin{pmatrix} \frac{d_1}{6} & -\frac{d_1}{3} & \frac{d_1}{6} \\ \frac{d_2}{6} & \frac{5d_2}{12} & -\frac{d_2}{12} \\ \frac{d_3}{6} & \frac{2d_3}{3} & \frac{d_3}{6} \end{pmatrix}.$$

Приравнивание коэффициентов полинома в соответствии с (6) – (7) приведет к следующей нелинейной системе

$$\mu_1 = trace(D^{-1}A) = \frac{d_1}{6} + \frac{5d_2}{12} + \frac{d_3}{6} = 3,$$

$$\mu_2 = \frac{d_1 d_2}{8} + \frac{d_2 d_3}{8} = 3,$$

$$\mu_3 = det(D^{-1}A) = \frac{d_1 d_2 d_3}{24} = 1.$$

Решением такой системы будут являться 4 действительных корня. Лучшему варианту диагонализации соответствует минимум из всех $max(\rho(Z(z))) = 0.5096384$.

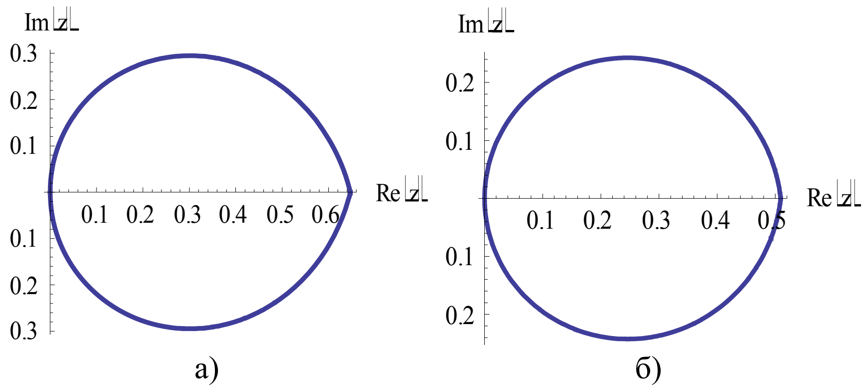


Рисунок 4 – Годографы функции $Z(z)$ для метода Лобатто IIIC порядка 4

Оценки параллелизма разработанных методов

Реализация предлагаемых алгоритмов, основанных на диагональных преобразованиях, ориентирована на использование многопроцессорных вычислительных систем с линейкой процессорных элементов. Набор процессоров известен до начала вычислений и не меняется в процессе счета, при этом каждый процессорный элемент может выполнить любую арифметическую операцию за один такт, временные затраты, связанные с обращением к запоминающему устройству, отсутствуют. В качестве примера рассмотрим неявный трехстадийный метод Лобатто IIIC порядка 4 с исходной матрицей (13), для которой был получен лучший вариант диагонализации

$$\begin{pmatrix} 0.6537 & 0 & 0 \\ 0 & 0.184059 & 0 \\ 0 & 0 & 0.3462998 \end{pmatrix}.$$

Характеристики параллелизма, ускорение и эффективность, исследовались для систем с изменяющимися трудоемкостями вычисления правых частей *ft*, принимающими значения *ft={10, 50, 100, 500, 5000}*. Реализация двухстадийного неявного метода с нижней треугольной матрицей на SIMD структуре с числом процессорных элементов, совпадающих с размерностью системы *m*, дает следующие показатели ускорения и эффективности.

Сравнение полученных показателей по группам позволяет утверждать, что показатели неявных методов с диагональными матрицами значительно превосходят соответствующие характеристики для методов полными матрицами, при этом по-

казатели тем лучше, чем выше трудоемкости вычисления правых частей, что объясняется сокращением отношения общего времени счета к времени реализации обменов между процессорными элементами.

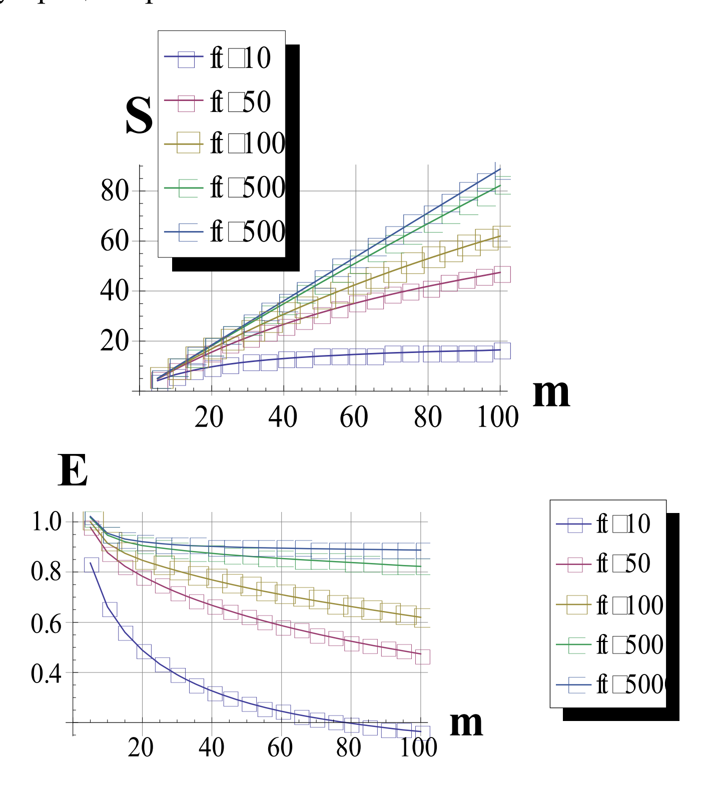


Рисунок 5 – Характеристики параллелизма 3-стадийного метода Лобатто IIIC с диагональной матрицей

Выводы

Работа направлена на сокращение числа обменов при параллельной численной реализации решения задачи Коши с помощью неявных методов, ориентированных на решение жестких уравнений и их систем. Предлагаемый подход базируется на модификации неявных многостадийных методов, обеспечивающей параллельное получение значений в стадийных точках, при этом обмен значениями процессоры осуществляют не после каждой итерации, а после получения значения для очередной расчетной точки. Такое радикальное сокращение числа обменов достигается за счет использования диагонального приближения исходной матрицы. Эффективность решения такой системы обеспечивается диагонализацией исходной матрицы неявного метода с обеспечением максимальной скорости сходимости при параллельной реализации.

Для классических неявных методов, которые используются для решения жестких уравнений и их систем, диагональные вхождения D сложны и требуют дальнейших модификаций, вовлекающих в расчеты сложную арифметику. Но окончательно построенные таким образом итерационные методы устойчивы, характеризуются высокой скоростью сходимости, обладают естественным параллелизмом, что обеспечивает их эффективную реализацию в параллельных вычислительных системах.

Рассмотрены варианты диагонализации известных стадийных методов. Приведена методика выбора лучшего варианта диагонального приближения, основывающаяся на минимизации спектрального радиуса матрицы.

Литература

1. Дмитриева О.А. Вариация шага при решении жестких уравнений блочными методами / О.А. Дмитриева // Сборник трудов конференции «МОДЕЛИРОВАНИЕ – 2010», (Киев, 14 – 16 мая 2010 г.). – К. : Институт проблем моделирования в энергетике, 2010. – Т. 2. – С. 5-12.
2. Embedded block parallel methods for initial Cauchy problem numerical solution / L.P. Feldman, I.A. Nazarova, O.A. Dmitrieva [etc.] // Proceedings of DNTU. – 2010. – № 1. – P. 12-17.
3. Дмитриева О.А. Параллельное моделирование жестких динамических систем диагонально неявными методами с адаптацией шага / О.А. Дмитриева, Я.А. Куприй // Наукові праці ДонНТУ. ІКОТ-2010. – Донецьк : ДонНТУ. – 2010. – Випуск 12 (165). – С. 111-116.
4. Дмитриева О.А. Управление шагом в блочных диагонально-неявных методах решения обыкновенных дифференциальных уравнений / О.А. Дмитриева // Наукові праці Донецького національного технічного університету. Серія «Інформатика, кібернетика та обчислювальна техніка» (ІКОТ-2010). – Донецьк : ДонНТУ. – 2010. – Випуск 11 (164). – С. 14-18.
5. Alisa Firsova. Dynamic System Simulation. Robust algorithms of state estimation of dynamic lumped parameters systems / Alisa Firsova, Olga Dmitrieva. – Lambert Academic Publishing, 2011. – 92 p.
6. Дмитриева О.А. Генерация численных методов решения дифференциальных уравнений высоких порядков / О.А. Дмитриева, Я.А. Куприй // Наукові праці ДонНТУ. САІТ-2011. – Донецьк : ДонНТУ. – 2011. – Випуск 1. – С. 152-156.
7. Хайрер Э. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие задачи / Э. Хайрер, Г. Ваннер. – М. : Мир, 1999. – 685 с.
8. P.J. van der Houwen. Iteration of Runge-Kutta Methods with Block Triangular Jacobians / P. J. van der Houwen, B.P. Sommeijer // J. of Applied Mathematics and Mechanics. – 1996. – Vol. 76. – P. 367-375.
9. Lioen W.M. On the diagonal approximation of full matrices / W.M. Lioen // CWI Report NM-R9518, submitted for publication, 1995. – 7 p.
10. Burrage K., Suhartanto H. Parallel iterated method based on Variable stepsize Multistep Runge-Kutta methods of Radau type for stiff problems / K. Burrage, H. Suhartanto // Adv.Comput. – 2000. – Math.13. – P. 257-270.

Literatura

1. Dmitrieva O.A. Sbornik trudov konferencii “MODELIROVANIE-2010”. Kiev. 14-16 maja 2010 g. K. :Institut problem modelirovanija v jenergetike. T. 2. 2010. S. 5-12.
2. Feldman L.P. Proceedings of DNTU. № 1. 2010. P. 12-17.
3. Dmitrieva O.A. NaukovipraciDonNTU. IKOT-2010. Donec’k :DonNTU. Vypusk 12 (165). 2010. S. 111-116.
4. Dmitrieva O.A. Naukovi praci Donec’kogo nacional’nogo tehnichnogo universitetu. Serija “Informatika, kibernetika ta obchisljuval’na tehnika” (IKOT-2010). Donec’k: DonNTU. Vypusk 11 (164). 2010. S. 14-18.
5. Firsova A. Dynamic System Simulation. Robust algorithms of state estimation of dynamic lumped parameters systems.Lambert Academic Publishing. 2011. 92 p.
6. Dmitrieva O.A. NaukovipraciDonNTU. SAIT-2011. Donec’k: DonNTU. Vypusk 1. 2011. S. 152-156.
7. Hajrer Je. Reshenieobyknovennyhdifferencial’nyhuravnenij.Zhestkiezadachi. M.: Mir. 1999. 685 s.
8. Houwen P.J. van der. J. of Applied Mathematics and Mechanics. Vol. 76. 1996. P. 367-375.
9. Lioen W.M. On the diagonal approximation of full matrices.CWI Report NM-R9518, submitted for publication. 1995. 7 p.

10 Burrage K. Adv.Comput. Math.13. 2000. P. 257-270.

О.А. Дмитрієва

Паралельне моделювання жорстких систем на основі діагоналізації повної матриці

У роботі пропонується підхід, що базується на неявних багатостадійних методах, модифікованих таким чином, що неявні стадії стають паралельними. Скорочення числа обмінів досягається за рахунок перетворення вихідної матриці, що приводить функціональний визначник до діагонального виду. Одержувані на основі такого підходу розрахункові схеми мають меншу обчислювальну складність і є досить ефективними при розв’язанні жорстких рівнянь.

O.A. Dmitrieva

Parallel Modeling of Stiff Systems on the Basis of a Diagonalization of a Full Matrix

This work suggests the approach, which is based on the implicit multistep methods, modified in such a way that implicit stages become parallel. Reduction of the number of exchanges is reached due to transformation of the initial matrix, leading a functional determinant to a diagonal kind. Design schemes gained on the basis of such approach have smaller computing complexity and are rather effective in solving stiff equations.

Статья поступила в редакцию 23.08.2011.